

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Романова Александра Андреевича «Термондуцированные структурные превращения в наночастицах Pt, Pd и Pt-Pd: молекулярно-динамическое моделирование», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния

Диссертационная работа А.А. Романова посвящена приложению методов молекулярно-динамического моделирования для исследования закономерностей и механизмов структурных превращений в одно- и двухкомпонентных наночастицах системы платина-палладий. Актуальность работы определяется как практической значимостью объектов исследования, так и важностью научных задач, решаемых диссертантом.

К наиболее значимым результатам работы, наряду с систематическим исследованием зависимостей температур плавления и затвердевания наночастиц платины и палладия, следует отнести ряд новых методических подходов, таких как алгоритм нахождения энтальпий плавления и кристаллизации для сложных форм петель гистерезиса плавления-кристаллизации, подбор критериев фиксации температур плавления и затвердевания наночастиц в молекулярно-динамическом эксперименте, дополнение молекулярно-динамического моделирования сегрегации в бинарной системе термодинамическим моделированием на основе подхода Батлера.

Тщательный подход автора к подбору, оптимизации и верификации параметров моделирования на основе использования двух независимо разработанных компьютерных программ и тестовых расчетов термодинамических, структурных и упругих характеристик объёмных фаз, позволяет считать полученные в работе результаты достоверными.

Текст автореферата хорошо структурирован, обсуждение адекватно иллюстрируется табличными данными и графическими материалами, все сформулированные по диссертации основные результаты и выводы логично следуют из изложенного в автореферате материала. Стоит отметить также и хороший русский язык текста, хотя в некоторых местах автору не удалось избежать грамматических и стилистических ошибок; последние, всё же, не затрудняют понимание и не снижают высокую общую оценку работы.

При чтении автореферата всё же возникли вопросы, требующие уточнения:

1. В тексте автореферата на странице 15 отмечается, что линейные аппроксимации размерных зависимостей температур плавления и затвердевания наночастиц платины пересекаются при числе атомов в наночастице  $N = 250-500$ . В то же

время, на рис. 5 для точки пересечения указано  $N = 166$ . Какие из значений правильны?

2. При исследовании сегрегации сплава Pt-Pd моделируемая наночастица нагревалась до температуры выше макроскопических температур плавления обоих компонентов, затем достаточно быстро охлаждалась до 300 К, и при этой температуре «релаксировала (отжигалась)». Учитывая, что указанная температура в 5-7 раз ниже температур плавления компонентов, достаточна ли она была для релаксации? Сильно ли отличалось конечное радиальное распределение компонентов от такового сразу после затвердевания наночастицы?

Однако указанные уточнения не являются существенными и возникшие вопросы не снижают общего очень благоприятного впечатления о работе. Результаты диссертации, несомненно, представляют большой научный интерес.

Судя по автореферату, диссертационная работа «Термоиндуцированные структурные превращения в наночастицах Pt, Pd и Pt-Pd: молекулярно-динамическое моделирование» представляет законченное самостоятельное исследование, выполненное на высоком научном и методическом уровне, и соответствует требованиям, предъявляемым пп.9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842 (в текущей редакции), а её автор, Романов Александр Андреевич, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Емельяненко Александр Михайлович,  
доктор физико-математических наук,  
заведующий лабораторией

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физической химии и электрохимии им. А.Н.  
Фрумкина Российской академии наук

Почтовый адрес: 119071, г. Москва,  
Ленинский проспект д. 31 корп. 4, ИФХЭ РАН  
e-mail: ame@phyche.ac.ru  
тел. (495) 955 4625

Подпись А.М. Емельяненко заверяю

Ученый секретарь ИФХЭ РАН, к.х.н.

Шапагина Н.А.